

## University of Groningen

### Some unusual aspects of correlated systems

Eskes, Hendrik Johan

**IMPORTANT NOTE:** You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

*Document Version*

Publisher's PDF, also known as Version of record

*Publication date:*

1992

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

*Citation for published version (APA):*

Eskes, H. J. (1992). *Some unusual aspects of correlated systems*. s.n.

**Copyright**

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

**Take-down policy**

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

, and T.S.

).

2).

B (1992).

## Samenvatting

Voor het theoretisch beschrijven van de elektronische structuur van een vaste stof (dit zijn de banen en energieën van de elektronen in het periodieke rooster gevormd door de atoomkernen) wordt vaak gebruik gemaakt van de "onafhankelijke elektronen" benadering. Volgens deze benadering bewegen de elektronen zich in een statisch, gemiddeld-veld van alle andere elektronen. Voor de beschrijving van het systeem hoeft nu slechts één elektron tegelijkertijd beschouwd hoeft te worden. In het geval van metalen met een gedeeltelijk gevulde  $s$  of  $p$  schil (zoals het metaal koper), of voor vaste stoffen opgebouwd uit volle schil ionen geeft een dergelijke aanpak vaak goede resultaten.

Vaste stoffen bestaan uit een zeer groot aantal elektronen. Deze hebben alle een negatieve lading en vanwege de elektrische afstoting bewegen ze zich in werkelijkheid niet onafhankelijk van elkaar maar proberen ze elkaar zo veel mogelijk vermijden. Het verplaatsen of verwijderen van één elektron heeft tot gevolg dat de rest van de elektronen zich dynamisch aanpast aan de ontstane niet homogene ladingsverdeling. Zulke dynamische effecten, dat wil zeggen die effecten die verwaarloosd worden in de bovengenoemde gemiddeld-veld benadering, noemen we "correlaties". Een theoretische beschrijving van de effecten van correlaties tussen elektronen vormt het centrale thema in dit proefschrift.

Correlaties uiten zich in de fysische eigenschappen van een materiaal. Gecorreleerde materialen zijn met name te vinden onder de verbindingen bestaande uit atomen met een  $3d$  ( $4d$ ) of  $4f$  buitenste schil. Een voorbeeld zijn de oxides van overgangsmetalen zoals Co, Ni, Fe en Cu: deze hebben alle een gedeeltelijk gevulde  $3d$  schil. Deze stoffen zijn isolatoren, terwijl vanuit het beeld van onafhankelijke elektronen een metaal verwacht zou worden. Verder zijn correlaties bepalend voor b.v. de magnetische eigenschappen van materialen (de overgangsmetaal-oxides zijn anti-ferromagneten). In dit proefschrift wordt met name gekeken naar koper-zuurstof verbindingen, waartoe ook de in 1986/1987 ontdekte klasse van supergeleiders met een uitzonderlijk hoge overgangstemperatuur ( $T_c$ ) behoort.

Het beschrijven van een gecorreleerd systeem is niet eenvoudig. Vanwege het dynamische karakter moeten alle elektronen tegelijkertijd beschouwd worden, in plaats van slechts één elektron per keer. Momenteel bestaan er slechts oplossingen voor een paar geïdealiseerde modellen (veelal één-dimensionale systemen). Vanwege deze moeilijkheid is de eerste stap in een theoretische aanpak van een gecorreleerd systeem het postuleren van een zo simpel mogelijk model (een zogenaamde model-Hamiltoniaan) dat zoveel mogelijk details van het systeem vermijdt, terwijl hopelijk toch de essentiële (temperatuur-afhankelijke) eigenschappen beschreven worden.

Voor de hoge  $T_c$  supergeleiders zijn drie modellen populair: het  $t$ - $J$  model, het één band Hubbard model en het drie banden Emery model. In hoofdstuk 2 wordt beargumenteerd dat de ladingsdragers een sterke tendens hebben tot het bezetten van specifieke, koper-achtige banen. Dit zou betekenen dat het drie banden model, waarin expliciet onderscheid gemaakt wordt tussen koper en zuurstof, te reduceren is tot het  $t$ - $J$  model, waarin alleen effectieve koperbanen voorkomen. We laten echter ook zien dat deze banen een breed energiespectrum hebben, en daarom waarschijnlijk andere banen overlappen, wat de situatie een stuk ingewikkelder maakt. De energie-posities van de

verschillende elektronen banen en de consequenties voor de bovengenoemde modellen worden besproken in hoofdstuk 2 en 4.

De materiaal-specifieke eigenschappen van de stof die men wil beschrijven met de model-Hamiltoniaan komen tot uitdrukking in (een klein aantal) parameters. Door experimentele gegevens te vergelijken met berekeningen kunnen we een schatting maken van de parameter-waarden in het  $t$ - $J$  model voor de hoge  $T_c$  supergeleiders. Dit gebeurt in hoofdstuk 3.

Experimenteel kan de elektronische structuur van vaste stoffen onder andere bepaald worden met behulp van spectroscopie. Dit is een verzamelnaam voor verschillende technieken waarbij een kristal bestraald wordt met een bundel elektronen of fotonen (licht of Röntgen-straling) en waarbij vervolgens de elektronen of fotonen die terugkomen gedetecteerd worden. De gemeten energie is dan een directe maat voor de energieniveaus in de vaste stof. In hoofdstuk 6 wordt gekeken naar de spectrale intensiteiten voor valentieband foto-emissie (foton in, elektron uit), en verschillende romp-elektron spectroscopieën. Uit deze experimenten blijkt duidelijk het gecorreleerde karakter van de elektronen in koperoxide verbindingen. Berekeningen waarin expliciet de elektron interacties op het koper meegenomen wordt geven een goede overeenkomst met het experiment te zien.

Elke spectroscopie kent zijn eigen specifieke somregels. Bijvoorbeeld in het geval van foto-emissie (in vereenvoudigde vorm) is de totale intensiteit van het spectrum, oftewel het spectrum geïntegreerd over energie, simpelweg gelijk aan het aantal elektronen in het systeem. In sommige spectroscopische metingen voor de hoge  $T_c$  supergeleiders lijkt echter aan de somregel niet voldaan te worden. Om de waargenomen intensiteiten beter te begrijpen introduceren we in hoofdstuk 7 een alternatieve somregel waarbij geïntegreerd wordt over slechts een gedeelte van het fotoemissie spectrum. Uit numerieke berekening van deze alternatieve somregel blijkt dat voor sterk gecorreleerde systemen een drastische herverdeling van spectrale intensiteit plaats vindt, overeenkomstig de experimentele waarneming.

Omdat typische energieën voor valentieband elektronen veel groter zijn dan de energieën van thermische excitaties in het systeem, zijn alleen de elektronen in de top van de valentieband van belang voor temperatuur-afhankelijke eigenschappen. Landau heeft beargumenteerd dat deze elektronen een sterk verminderde wisselwerking hebben met de andere elektronen in het systeem, dat wil zeggen de elektronen in de hoogste energieniveaus gedragen zich min of meer als onafhankelijk van elkaar. Voor de hoge  $T_c$ 's daarentegen zijn in de literatuur verschillende mechanismen voorgesteld waarbij, als gevolg van de sterke interacties, aan dit normale Landau gedrag niet voldaan wordt. In hoofdstuk 8 stellen we een mechanisme voor dat een soortgelijk niet conventioneel gedrag impliceert. Dit zou kunnen optreden bij sommige verbindingen van overgangsmetalen (echter niet voor koper), en een beschrijving wordt gegeven van de voorwaarden waaraan zulke stoffen moeten voldoen.

## Nawoord

Dit proef-  
geestelijke, pra  
Het mees  
Door zijn bred  
waar genoeg  
Bovendien is z  
stimulans gew

In de eers  
artikel geschre  
andere over wa  
van Elp op het

Ik dank L  
mogelijkheid va

My stay in  
together with Jo  
John and Lou Fe

I thank Jir

Dankzij h  
promotie al een

De SON  
conferenties te  
van de "hete har

Hoofdstuk  
fundamentele vr

Bart Pestm

Van Jacob  
steeds aan dat n

Het dagel  
prettig ervaren.

nodige hoevee  
doorgelezen en

werk uit handen

Marieke B  
leuke dingen te